

APLICACIONES INFORMÁTICAS EN QUÍMICA

Problemas Tema 3.1:

Manipulador Algebraico-1

Variables, operadores, expresiones

Grado en Química

1º SEMESTRE

Universitat de València

Facultad de Químicas

Departamento de Química Física



Esta obra está bajo una [licencia de Creative Commons](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/)

I. CÁLCULOS ARITMÉTICOS

1. Ejemplo de cálculo convencional: $3.4 \times 6.5 \times 7$

Res.: 154.7

2. Efectuar las siguientes operaciones, comprobando la diferencia entre usar números enteros y decimales.

Obtener primero los resultados con todas las cifras que de el MA.

Obtener luego los mismos resultados con tres cifras decimales.

a)	$\sqrt{2}$	$\sqrt{2} \sqrt{3}$	$\sqrt{12}$	$\sqrt{6} \sqrt{10}$	$\sqrt[3]{6} \sqrt[3]{10}$
b)	$\frac{1}{2} + \frac{1}{3}$	$\frac{1}{4} - \frac{1}{5}$	$\frac{16}{20}$	$\frac{2}{3} \frac{5}{7}$	$\frac{1}{6} + \frac{2}{3} \frac{5}{8}$
c)	$\frac{3(4+5)}{2(6-1)}$	$\frac{\sqrt{3}(4+5/9)}{\sqrt{2}(6-1)}$	$\frac{7-11}{(6-1)/5} - \frac{2}{7}$	$\frac{1}{15} + \frac{2}{7} - \frac{6}{5}$	$\sqrt{\frac{1}{15}} + \frac{\sqrt{2}}{7} - \frac{\sqrt{6}}{\sqrt{5}}$
d)	$1 + \frac{1 + \frac{1}{2}}{2}$	$6\sqrt{\frac{\sqrt{2}}{2}}$			$5\sqrt{\frac{\sqrt{3}}{3}}$
e)	$\frac{(4+5)[2(2-3)+6(5-1)]}{5(4-1)-(2-3)6}$				

Res.:

1.414	2.449	3.464	7.746	3.915
.8333	-3.083	0.800	.4762	.5833
2.7	1.116	-4.286	-.8476	-.6352
1.266	1.328			
9.429				

3. Realice las siguientes operaciones para practicar el input del MA y las diferencias entre usar puntos decimales o no al operar con números

- a) $1+(1+(1+(1+(1+(1+(1+(1+10)))))))$
- b) $\frac{345}{12457} + \frac{567}{234567} - 2$ $\sqrt{1+\sqrt{1+\sqrt{1+\sqrt{5}}}}$
- c) $\frac{345}{12457} + \frac{567.25}{234567} - 2$ $\sqrt{1+\sqrt{1+\sqrt{1+\sqrt{5.00}}}}$
- d) $1 + \frac{1}{1 + \frac{1}{1 + \frac{1}{1 + \frac{1}{5}}}}$

Res.:

a)	18	
b)	-639557056/324666791	1.6349
c)	-1.9699	1.6349
d)	1.6471	

4. Cálculos con números grandes. Observe la diferencia respecto a una calculadora convencional que solo puede dar 12 dígitos

- | | | |
|----|--------------|-------------------------------------|
| a) | 3^{25} | 847 288 609 443 |
| b) | 3^{30} | |
| c) | 3^{40} | |
| d) | 5^{55} | |
| e) | 3^{100} | |
| f) | 3^{1000} | |
| g) | 3.00^{100} | 5.1537752...x10⁴⁷ |

5. Calcular el número de moléculas en un vaso de agua (destilada, a 4° C) de 100 ml. (1 L pesa 1 kg).

Res.: 3.343×10^{24} moléculas de agua

6. Número de núcleos de H (protones) en 1.00 m³ (aproximadamente equivalente a 1 t = 1000 kg) de agua.

Res.: 6.686×10^{28} núcleos

7. Un 1.15% son núcleos de Deuterio (D). ¿Cuántos D hay en 1.00 m³ de agua?

Res.: 7.689×10^{26} núcleos

II.- VARIABLES

Ejemplos de problemas para ser resueltos tratando de tener en cuenta las unidades.

1. Calcular la temperatura de un gas ideal de masa atómica igual a 18 unidades si $p=2$ atm, $V=100$ L, masa=2 kg

Res.: 21.95 K

2. Dada la reacción en fase gaseosa: $2\text{NO}(g) + \text{O}_2(g) \rightarrow 2\text{NO}_2(g)$ ¿Cuántos gramos de oxígeno reaccionan con cinco moles de monóxido de nitrógeno suponiendo que la reacción consume todo el NO? ¿Qué volumen ocupará el producto de la reacción a $p=2$ atm y $t = 30^\circ \text{C}$?

Res.: 79.997 g de O₂; 62.146 L

3. Calcular la energía cinética en J de un objeto de masa 3,00 kg moviéndose a 6,50 m/s

Res.: 63.4 J

4. a) Obtener la energía cinética en J de un coche de 1000.0 kg moviéndose a 100 km/hora. b) Con esa energía, ¿cuántos L de agua podrían evaporarse? (a 25°C se necesitan 44.02 kJ para evaporar un mol de agua) c) Con esta energía, ¿a qué altura podría levantarse desde el suelo una persona de 80 kg.?

Res.: a) 385.8 kJ ; .1579 L; 492.1 m

5. Una vez resuelto el problema anterior, será fácil cambiar el valor de la velocidad en km/h. Obtener la altura a que se levanta el cuerpo de 80 kg si la velocidad es de 80 km/h, 60 km/h, 40 km/h, y 20 km/h.

Res.: 314.9 m; 177.2 m; 78.74 m; 19.68 m;

III.- EXPRESIONES

1. Simplificar la expresión algebraica:

$$(x + y + z)^3 - (x + y - z)^3 - (x - y + z)^3 - (-x + y + z)^3$$

Res.: 24 x y z;

2. Realice las siguientes operaciones:

a) $\frac{x-a}{4} + \frac{x-2a}{x+3a}$

b) $\frac{6x-5}{2} - \frac{2x-8}{3}$

c) $\frac{x+3}{x-2} + \frac{x+1}{x+2}$

d) $\frac{a-5b}{2-3b} + \frac{3a+2b}{2-6a}$

3. Desarrolle la séptima potencia de la suma de a y b y la octava de su diferencia. Obtenga la diferencia entre ambos desarrollos.

4. Descomponga en productos los polinomios:

a) $x^3 - 2x^2 - 5x + 6$

b) $x^6 + 2x^5 - 8x^4 - 14x^3 + 11x^2 + 28x + 12$

c) $b^4 - 2a^2b^2 + a^4$

d) $b^6 - 3a^2b^4 + 3a^4b^2 - a^6$

5. Saque factores comunes en la expresión: $a^3b - ab^3$

6. Saque factores comunes en la expresión

$$-\sqrt{a} b^{5x} e^{-ab^2} + 3\sqrt{a} b^{5x} e^{-ab^2} x - 5\sqrt{a} b^{5x} e^{-ab^2+2c} - 2\sqrt{a} b^{5x} e^{-ab^2} x y + 3\sqrt{a} b^{5x} e^{-ab^2} y^5$$

IV.- EXPRESIONES : PROBLEMAS APLICADOS

1. Suponga el siguiente caso: Se ha medido la velocidad a la que se calientan dos muestras de materiales diferentes, A y B. Las velocidades de calentamiento de ambas muestras, entre 20° y 500° se han ajustado a expresiones matemáticas:

Muestra A: $v_A = 4.52/t + 0.02 t^2$.

Muestra B: $v_B = 19.99 + 3.123 t + 0.0015 t^{1/2}$.

- Obtener una expresión para la diferencia de velocidades
 - Obtener el valor de esta diferencia a 100° , 200° , 300° y 400° .
2. Calcular distancias entre objetos que se mueven: Distancias dependientes del tiempo t.

Tomaremos $r^2 = a^2 + b^2$ y veremos qué pasa si a o b dependen de t

- $a=kt$
 - $a=kt$, $b=Kt$
 - $a=t_0 + kt$, $b=t_0 - kt$
 - $a=((t+b)^2)/2$, $b=s+1$
3. La llamada “fuerza centrípeta” es la que permite mantener un cuerpo de masa m girando con movimiento circular uniforme. Está relacionado con la velocidad y el radio de giro por la expresión

$$f = m v^2 / r.$$

Sabiendo que v está relacionada con la velocidad angular w por la relación $v=wr$ y que la velocidad angular está relacionada con el llamado “periodo de giro, T” por $w=2\pi/T$, dar la relación entre el valor de la fuerza y el periodo T
 NOTA: La fuerza, la velocidad , la velocidad angular y el radio son vectores. Aquí se trata de relaciones entre “módulos” de esos vectores.

4. Buscando relaciones físicas donde aparezca la aceleración debida a la gravedad, g, encontramos estas dos:

El periodo de oscilación de un péndulo vale $T = (4 \pi^2 l) / g$

donde l es la longitud del péndulo.

La aceleración g está relacionada con la masa de la tierra, M y su radio R, por $g = G (M/R^2)$ siendo G la constante gravitatoria universal de Newton.

Obtener la expresión de T que permita calcular la Masa M de la tierra conocido su radio R

5. El llamado "potencial de interacción intermolecular de Kratzer", propuesto en 1920, tiene la forma $V = -\frac{a}{x+x_0} + \frac{b}{(x+x_0)^2}$.

Obtener otras formas del potencial V en función de R y R_m sabiendo que entre a y b hay una relación dada por $x_0 = 2b/a$ y que $x = R - R_m$ siendo $R_m = x_0$.

6. La ecuación de estado de van der Waals de los gases reales tiene la forma (para un mol de gas) $\left(P + \frac{a}{v^2}\right)(v-b) = RT$; A su vez, los parámetros a y b se obtienen, para un gas concreto, a partir de las llamadas "constantes críticas" de ese gas, por medio de las relaciones: $a = \frac{9}{8}R T_c v_c$ y $b = \frac{v_c}{3}$.

a).- Obtener la ecuación de estado de van der Waals en función de las constantes críticas: T_c (temperatura crítica) y v_c (volumen molar crítico).

b).- Sabiendo además que el "factor de compresibilidad crítico" se define como $z_c = \frac{P_c v_c}{R T_c}$, obtener la ecuación de vdW en función de la P_c , la T_c y z_c , pero no el v_c .